

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平7-200040

(43) 公開日 平成7年(1995)8月4日

(51) Int.Cl. [*]	識別記号	庁内整理番号	F I	技術表示箇所
G 0 5 B 19/418 11/32	A	7531-3H 7531-3H	G 0 5 B 15/ 02	S

審査請求 未請求 請求項の数9 O L (全 16 頁)

(21) 出願番号 特願平6-303317

(22) 出願日 平成6年(1994)12月7日

(31) 優先権主張番号 1 6 5 1 5 5

(32) 優先日 1993年12月10日

(33) 優先権主張国 米国 (U S)

(71) 出願人 591264544

イーストマン・コダック・カンパニー
アメリカ合衆国、ニュー・ヨーク・14650、
ロチェスター、ステイト・ストリート・
343

(72) 発明者 ロバート ウィリアム ホブキンス
アメリカ合衆国 ニューヨーク州 ロチェ
スター パークサイド レーン 30

(72) 発明者 ペイジ ミラー
アメリカ合衆国 ニューヨーク州 ロチェ
スター コンスタンス ウェイ イースト
16

(74) 代理人 弁理士 吉田 研二 (外2名)

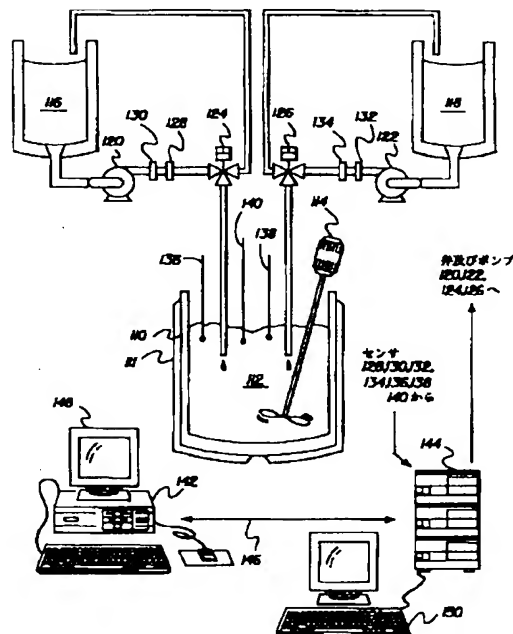
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 製造プロセスを制御する方法

(57) 【要約】

【目的】 とくにプロセス変数の数が増えた場合の、問題の発生源の識別を容易にする方法を提供する。

【構成】 ケトル110には加熱ジャケット111が備えられており、ケトルの中身は攪拌装置114によって攪拌される。硝酸銀溶液供給槽116から供給された硝酸銀溶液と塩溶液供給槽118から供給された塩溶液が、硝酸銀溶液ポンプ120及び塩溶液ポンプ122、コンピュータで制御された弁124及び126を通じて投入される。硝酸銀溶液の流量と圧力は流量センサ130と圧力センサ128で監視される。塩溶液の流量と圧力は流量センサ132と圧力センサ134で監視される。ケトル110内の中身112の温度、銀濃度、pHは温度センサ136、vAgセンサ138、pHセンサ140で監視される。すべてのセンサの出力は、診断コンピュータ142とプロセス制御コンピュータ144に供給される。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 製造プロセスを制御する方法であって、

a) 上記プロセスの動作中に、複数のプロセス変数と製品変数の両方あるいは片方を表わすデータを収集する工程と、

b) 多変量解析法を使用して、上記プロセスが管理されているかどうかを示す値を持つ代替変数を生成する工程であって、上記代替変数は、複数の中間変数の関数であって、上記中間変数の各々は、上記プロセス変数と製品変数の両方あるいは片方の重み付けされた関数である上記工程と、

c) 上記代替変数の値が所定の限界を外れたとき、上記中間変数のどれが、上記代替変数の値に主に寄与したかを判定する工程と、

d) 上記工程で判断された中間変数につき、上記プロセス変数のどれが、上記判定された中間変数の値に主に寄与したかを識別する工程と、

e) 上記工程で識別された上記プロセス変数を変更して、上記代替変数の値を上記所定の限界内に戻すために、上記プロセスを修正する工程とからなることを特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項2】 請求項1に記載の製造プロセスを制御する方法であって、上記多変量解析法は主成分分析法（PCA）あるいは部分最小2乗法（PLS）であって、上記代替変数は量 T_1^2 であって、次のように定義され、

【数1】

$$T_1^2 = \sum_{d=1}^D \frac{t_{1,d}^2}{\sigma_d^2},$$

ここで、Dは中間変数の数であって、

$t_{1,d}^2$ は、主成分分析法の場合は、i 番目の観測のd 番目の中間変数を2乗したものであって、部分最小2乗法の場合は、i 番目の観測のXブロックのd 番目の中間変数を2乗したものであって、

σ_d^2 は、主成分分析法の場合は、すべての観測にわたるd 番目の中間変数の標準偏差を2乗したものであって、部分最小2乗法の場合は、Xブロックのd 番目の標準偏差を2乗したものであること、

を特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項3】 請求項2に記載の製造プロセスを制御する方法であって、どの中間変数が代替変数の値に主に寄与しているかを判定する上記工程が、中間変数により T^2 に対する寄与を計算する工程と、最大の寄与を持つ中間変数を選択する工程とからなり、 T^2 に対する寄与が個々の項 $t_{1,d}^2 / \sigma_d^2$ であること、を特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項4】 請求項3に記載の製造プロセスを制御する方法であって、どのプロセス変数が、上記判定された中間変数に主に寄与しているかを識別する上記工程が、上記判定された中間変数に対する各々のプロセスの寄与

を計算する工程からなり、上記中間変数が次式によって計算され、

【数2】

$$t_{1,d} = x_{1,d} P_{1,d} = \sum_{j=1}^J x_{1,j} P_{j,d},$$

上記中間変数に対する寄与が $x_{1,j}$ 、 $P_{j,d}$ であり、ここで、 $x_{1,j}$ は観測iのj番目のプロセス変数の値であり、 $P_{j,d}$ はd番目の中間変数とj番目のプロセス変数とのローディングであることを特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項5】 製造プロセスを制御する方法であって、

a) 上記プロセスの動作中に、複数のプロセス変数と製品変数の両方あるいは片方を表わすデータを収集する工程と、

b) 多変量解析法を使用して、上記プロセスの全体的状態を示す値を持つ代替変数を生成する工程であって、上記代替変数は、複数の中間変数の関数であって、上記中間変数の各々は、上記プロセス変数と製品変数の両方あるいは片方の重み付けされた関数である上記工程と、

c) 上記代替変数の値が所定の限界を外れたとき、上記中間変数のどれが、上記代替変数の値に主に寄与したかを判定する工程と、

d) 上記工程で判断された中間変数につき、上記プロセス変数のどれが、上記判定された中間変数の値に主に寄与したかを識別する工程と、

e) 上記工程で判定されたプロセス変数のパターンと、特定のプロセス障害を示すプロセス変数の既知のパターンとを比較する工程と、

f) プロセス変数の上記パターンが一致したとき、上記プロセスを停止する工程と、

g) 上記工程で識別された上記プロセス変数を変更して、上記特定のプロセス障害を訂正するために、上記プロセスを修正する工程と、

からなることを特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項6】 請求項5に記載の製造プロセスを制御する方法であって、上記多変量解析法は主成分分析法（PCA）あるいは部分最小2乗法（PLS）であって、上記代替変数は量 T_1^2 であって、次のように定義され、

【数3】

$$T_1^2 = \sum_{d=1}^D \frac{t_{1,d}^2}{\sigma_d^2},$$

ここで、Dは中間変数の数であって、

$t_{1,d}^2$ は、主成分分析法の場合は、i 番目の観測d 番目の中間変数を2乗したものであって、部分最小2乗法の場合は、i 番目の観測のXブロックのd 番目の中間変数を2乗したものであって、

σ_d^2 は、主成分分析法の場合は、すべての観測にわた

るd番目の中間変数の標準偏差を2乗したものであって、部分最小2乗法の場合は、Xブロックのd番目の標準偏差を2乗したものであること、

を特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項7】 請求項6に記載の製造プロセスを制御する方法であって、どの中間変数が代替変数の値に主に寄与しているかを判定する上記工程が、中間変数により T^2 に対する寄与を計算する工程と、最大の寄与を持つ中間変数を選択する工程とからなり、 T^2 に対する寄与が個々の項 $t_{i,d}^2/\sigma_d^2$ であること、

を特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項8】 請求項7に記載の製造プロセスを制御する方法であって、どのプロセス変数が上記代替変数の値に主に寄与しているかを判定する上記工程が、上記判定された中間変数に対する各々のプロセス変数の寄与を計算する工程と、寄与値が所定の限界以上のプロセス変数を選択する工程とからなることを特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【請求項9】 請求項8に記載の製造プロセスを制御する方法であって、上記中間変数が次式によって計算され、

【数4】

$$t_{i,d}^2 = x_{i,j} p_{jd} = \sum_{j=1}^d x_{ij} p_{jd}$$

上記中間変数に対する寄与が $x_{i,j}$ 、 $P_{j,d}$ であり、ここで、 $x_{i,j}$ は観測iのj番目のプロセス変数の値であり、 $P_{j,d}$ はd番目の中間変数とj番目のプロセス変数とのローディングであること、

を特徴とする製造プロセスを制御する方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】本発明は、製造プロセス制御に関し、とくに、多変量品質管理技法を用いた製造プロセス制御の方法に関する。

【0002】

【従来の技術】最も一般的に使用されている種類の統計的プロセス制御（SPC）では、プロセス変数と製品変数の一方あるいは両方の値を記録し、任意のプロセス変数あるいは製品変数が所定の限界から外れた時間を示す単一変数（単一変量）管理図を使用する。しかし、この方法は、プロセス変数の数が非常に多くなると（たとえば20個以上）、あるいは、化学製造プロセスの場合のように、プロセス変数が相互作用する場合は、実用的でなくなる。多数のプロセス変数を持つプロセス、あるいはプロセス変数が相互作用するプロセスを監視する技法は、多変量品質管理技法として知られている。一般的に、多変量品質管理技法の応用は、プロセスおよび製品の両方あるいは一方の変化性の二つの主要な発生源を検出することを目指したものである。二つの主要な発生源

とは、（1）センサの不正確さあるいは故障、そして（2）プロセスを駆動している力学を変動させる、原料と製造プロセスの両方あるいは一方の変化である。多変量解析法の一つの形式が、主成分分析法（PCA）として知られている。B. M. Wise, N. L. Richter, D. F. Veltkamp, B. R. Kowalski (1990) の "A theoretical basis for the use of principal components models for monitoring multivariate processes", Process Control and Quality, 1, 41-51 参照。Wise等は、多変量解析法により、センサの故障とプロセスの変化の両方を検出できることを示した。とくに、Wise等は、任意の動的線形時不変状態空間モデルを、状態が主成分分析スコアに直接関係するように、常に変換できることを示した。さらに、Wise等は、プロセスが状態よりも著しく多くの測定値を持っているときは（このような状態は頻繁に発生する）、多変量解析法が最も有効であり、そして、任意の動的プロセスにおいて、測定値数が増加するかあるいはサンプリング周期が増加した場合、多変量解析法がプロセスが管理を外れた時間を識別するのに適切であることを示した。一般的に、主成分分析法は、プロセスデータだけを使用した製造プロセスを管理するときに使用される。

【0003】上記以外に、部分最小2乗法（PLS）と呼ばれる多変量解析技法があり、これは、プロセスデータと製品データの両方を使用してプロセスを管理するとき使用される。M. StoneおよびR. J. Brooks (1990) の "Continuum Regression: Cross-validated Sequentially Constructed Prediction Embracing Ordinary Least Squares, Partial Least Squares and Principal Components Regression", Journal of the Royal Statistical Society B, 52, 237-269 参照。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】従来の様々な多変量解析法は、プロセスの状態を示すと共に、プロセスが管理を受けているかあるいは管理から外れているかを値で示す代替変数（surrogate variables）の小集合（たとえば、2個）の形成と解析を必要とする。従来の多変量解析法を使用すればプロセスが管理から外れた時間を効率的に識別する可能であるが、とくにプロセス変数の数が増加すると、問題の発生源を判断することが困難になることが多い。

【0005】

【課題を解決するための手段および作用】本発明は、上記の問題を解決することを目的としている。要約すると、本発明の一つの局面によれば、製造プロセスを次の工程で管理する。つまり、プロセスの動作中に、プロセスと製品の両方あるいは一方の複数の変数を示すデータを収集する工程；多変量解析法を使用して、プロセスが管理されているかどうかを示す値を持つ代替変数を発生する工程であって、この代替変数は複数の中間値の関数であり、各々の中間値はプロセス変数あるいは製品変数の重み付けした関数であるような工程；代替変数の値が、プロセスが所定の範囲から外れた時間を示すとき、どの中間変数がその代替変数に最も寄与しているかを判定する工程；上記工程で判定された中間変数につき、どのプロセス変数が、判定された中間変数の値に最も寄与しているかを判定する工程；そして、プロセスを修正して、上記工程で識別されたプロセス変数を変更し、プロセスを所定の範囲内に戻す工程。

【0006】本発明は、次の理由で、従来技術よりも有利である：

(1) 多変量統計では、多変量アウトライアー (outlier) を検出できるが、どのプロセス変数が管理を外れているかを直ちに示すことはできない。プロセス変数管理図は、どのプロセス変数が管理を外れているかを示すには有用であるが、多変量アウトライアーを検出することができない。本発明の方法によれば、多変量アウトライアーを検出できると共に、どのプロセス変数が、管理から外れた条件の原因になっているかを示すことができる。

【0007】(2) 多数の変数を持つプロセスの単一変数管理図は、誤った情報 (たとえば、誤信号) の原因になる。誤信号が発生すると、操作員は管理図に信頼を置かなくなる。たとえば、 2σ の範囲内で管理された、ほぼ互いに独立した10個の変数 (より大きな集合の相関変数に含まれている場合もある) を持つプロセスを仮定しよう。これらの10個の変数のどれかが、その $\pm 2\sigma$ の範囲内に入る確率は、約95%である。これらの10個の変数のすべてが、この範囲内に入る確率は、 $95\%^{10} = 60\%$ になる (10個の変数のすべてが独立していると過程)。したがって、少なくとも1個の変数が、その $\pm 2\sigma$ の範囲から外れる可能性は40%であり、そのとき、実際には、すべての変数が管理内にある。多変量方式では、この問題を回避できるが、どのプロセス変数が問題の原因なのかを示すことはできない。本発明は、この問題の発生源を直ちに識別するための方法を提供する。

【0008】(3) 管理中のプロセスが、写真乳剤製造のような、バッチ (一括処理作業) プロセスの場合、管理図は、すべてのバッチにわたり、1個の変数を処理対象とする。本発明による方法では、一つのバッチ (あるいは、いくつかのバッチの集合) のすべての変数を処理

対象とする。したがって、一つのバッチ (あるいは、いくつかのバッチの集合) のデータにどのような問題が存在するかを判断することは、本発明による方法で容易に行えるが、管理図でこれを行なうことは容易ではない。

【0009】(4) 本発明による方法において多変量統計を使用すると、収集したすべての変数を調査で使うことが可能になる。それにより、技術者は変数の数を管理可能な数以下に保つ必要がなくなる (発明者の経験では、管理可能な数とは5~10である)。これは、二つの理由で重要である。まず、ある変数は、他の変数のように重要ではないという技術上の判断により、解析されずに放置される場合が多い。しかし、プロセスが予想外の変化をみせた場合、放置された変数が重要な変数になることがある。

【0010】本発明の上記及びその他の局面、目的、特徴及び利点は、以下の好適な実施例と特許請求の範囲の詳細な説明を読み、図面を参照することで、一層明らか理解できるであろう。

【0011】

【実施例】以下、本発明を、写真乳剤製造プロセスを例にとって説明するが、本発明はいかなる製造プロセスにも適用できることは理解できると思う。

【0012】記法：どのSPC応用でも同様であるが、本発明においても、まず、プロセスの挙動を示すと共に、SPCモデルの基礎 (訓練セットあるいは履歴参照分布 (historical reference distribution)) として使用するn個の観測結果の集合について説明する。このモデルは、未来の観測結果を検討すると共に、元のn個の観測結果における特殊原因を検出するのに使用する。i 個目の観測結果につき、(行) pベクトル x_i で示されるp個のプロセス変数 (たとえば、温度、圧力、流量など) が存在する。製品特性 (たとえば、粒度、写真特性、硬さなど) を使用する場合、上記の観測につき、(行) qベクトル y_i で示されるq個の製品変数も存在する。n個の観測の完全な集合は、 $n \times p$ 行列Xと $n \times q$ 行列Yで示される。

【0013】データの前処理：一般性を失うことなく、データ行列XとYの列は、平均を中心としてしていると仮定した。そうすることで、記法が著しく簡単になる。データ行列の縦列を、各々の変数の標準偏差で割ることにより、データのスケールリングを行って、複数の異なる単位の存在に起因する複雑さを回避することは、一般に行われていることである。主成分分析法及び部分最小2乗法は、スケールリング不変ではないので、変数のスケールリング因子の選択は慎重に行なうべきである。

【0014】主成分分析法及び部分最小2乗法の背景
本発明による、代替変数及び中間変数に対する寄与を決定する方法は、主成分分析法あるいは部分最小2乗法のどちらが実現されているかに依存する。これらの二つの技法は、密接に関連している。両方とも、ある意味でデ

ータの重要な特徴を示す導来中間値のより少ない数と、プロセス全体の状態を示す代替変数のさらに少ない数（たとえば、2）とに関する多数のオリジナルの変数を示す。

【0015】主成分分析法（PCA）において、Xを次式で示されるように分解する：

【数5】

$$X = TP' + E$$

ここで、正規直交の $p \times D$ 行列 P は、ローディング（loading）として知られている係数の集合を示し、 T は中間変数の直交 $n \times D$ 行列である。 D は、主成分分析方における中間値数であり、 $D \leq$ 階数（ X ）である。本発明では、 $T' T = I$ のスケーリング規約を採用している。ここで、 I は $X' X$ の順序固有値対角行列である。 D が階数（ X ）よりはるかに小さいことが非常に多く、その場合、 T は X に対するより低次元の近似として使用でき、そして、 X ではなく T を使用することによ

$$* X = \hat{X} + E$$

(1)

ここで、 X と E が残留値の行列であることから、 X^{\wedge} （ \wedge 付き X ）はこれから決定する近似値である。線形代数の概念により、数式（1）は次のように書けることが知られている：

* 【数6】

(2)

10※り、大きな時間節約を達成することができる（ T は、実際は、 X を P に対して正射影したものである）。

【0016】中間変数の値は、各々の次元（あるいは、データ X を通過する方向）のどこに各々の点が存在するかを示す。この方法の利点は、 p 変数ではなく D 中間変数でデータを検査できることである。また、本発明では、量 T_i^2 を観測 i の代替として、次のように定義する：

【数7】

$$T_i^2 = \sum_{d=1}^D \frac{t_{id}^2}{\sigma_d^2}$$

(3)

ここで、 t_{id} は、 i 番目の観測の d 番目の中間変数であり、そして σ_d は、すべての観測にわたる d 番目の中間変数の標準偏差である。

【0017】 T^2 の通常の見方は、 $D =$ 階数（ X ）の使用を伴うが、本発明で使用するものは、 T^2 の計算（ $D \leq$ 階数（ X ））において主成分分析法（PCA）のために選択した中間変数だけである。そうすることにより、 T^2 が、雑音である中間変数に対してではなく、真のプロセス変化である中間変数に対して反応するようになる。 T^2 は、任意の観測につき、プロセスが管理から外れているかどうかを判断するために使用できる1個の数である。主成分分析法は、多数の統計ソフトウェア製品によって実行することができ、また、多数の線形代数ソフトウェア製品によっても実行できる。現代のコンピュータ★

$$X = TP' + E$$

しかし、この場合、2乗残留値 E の和は最小化されない。その代わりに、品質特性 Y を導入して、次式を満足する D 次元の Y スコア U とローディング Q の集合を保持☆40

$$Y = UQ' + F$$

ここで、 F は、残留値の行列である。モデルを完成するために、 T と U の d 番目の次元を、次の内部式で直線的◆

$$t_{id} = b_{du} u_d + g_d$$

ここで、 b_{du} は、 x_d スコア及び y_d スコア間の回帰係数であり、 g_d は残留誤差である。部分最小2乗法では、段階的な最適性基準を使用する。 P （ $d = 1$ に対応）の最初の縦列は、 t_1 及び u_1 間の共分散が最大になるように選択される。 t_1 及び u_1 間の2乗共分散の最大化

★の処理速度をもってすれば、比較的大きなデータ集合さえも、短時間で処理することができる。主成分分析法で得られた中間変数は、最小2乗の意味において、 X を D 次元で最良に示すものである。しかし、 X と Y の関係は、主成分分析法ではとらえられない。したがって、中間変数は、ある程度まで、プロセスの管理にとって重要ではない情報に集中する。このような場合、 Y に影響を与えないプロセス変数に重きを置かないようにすることが望ましい。部分最小2乗法（PLS）は、そのための一つの方法である。部分最小2乗法は、主成分分析法と密接に関連している。しかし、最小2乗法の基準ははるかに複雑である。前述のように、次式を与えることができる：

【数8】

(4)

☆する：

【数9】

(5)

◆に関連付ける：

【数10】

(6)

は、 X 及び Y を同時に適合させるための一つの方法である。この縦列は、 $X' Y Y' X$ の最初の固有ベクトルとして得ることができる。残りの行列 E 及び F は、 P の第二（そして、それ以降）の中間変数を決定するとき、 X および Y に代わって使用される。したがって、部分最小

2乗法では、Xの順次直交部分空間において最大の2乗共分散を持つX（及びY）の線形結合を決定する。

【0018】中間値数の決定：主成分分析法（PCA）においては、中間変数 t_d の数Dを選択する方法は多数存在する。一般的な方法のひとつは、全変化性の95%が説明できるように、最初のD個の中間変数を選択する方法である。他の方法は選抜検査であり、 $X'X$ の固有値 λ_i を、 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$ 階数（X）というように、大きさが小さくなる順序で配置する。 λ_i は y 軸に沿って作図され、 i は x 軸に沿って作図される。グラフに現われる最初の一定の傾斜の位置が、選択すべき中間変数の数を示す。

【0019】部分最小2乗法（PLS）の場合、Dを選択するための最も一般的な方法は、相互有効化（クロスバリデーション、cross validation）である。この方法の概要は、まず、データの一部分集合を外しておき、残りのデータを使用してモデルを適合させ、そして、外しておいたデータの部分集合を予測する。この操作を、外しておいた他のすべての部分集合*

$$t_{id} = x_i p_d = \sum_{j=1}^p x_{ij} p_{jd}$$

ここで、 x_i はXの i 番目の横列である。したがって、 t_{id} は p 個の項 $x_{ij} p_{jd}$ 、 $j=1, \dots, p$ に分解できる。これらは、中間変数 t_{id} に対する寄与である。寄与図は、これらの p 個の寄与を棒グラフで表したもので、以下に示すように縮尺してある。一例を図1に示す。大きな値は、正であれ負であれ、その大きなスコアに最も大きく寄与した元のプロセス変数あるいは製品変数を指示するものである。図1に示すように、中間変数1において通常でないこのバッチに最も寄与している変数は、プロセス変数12、13、16及び17である。元のデータの管理図では、このバッチの場合、これらの変数は異常に大きい。各々の図の大量の変数を検査することは、実行不可能な作業であり、そして寄与変数のパターンは、これから発生する障害を診断する上で容易に認識できる特定種類のプロセス障害を示している。

【0021】上記寄与は、ローディングとデータ値の積であり、したがって、これらの寄与は、ローディング p_{jd} が大きいので、あるいはデータ値 x_{ij} が大きいので（平均からの偏差に関し）、あるいはその両方なので、大きくなる。最大のローディングの解釈に基づく技法は、ローディングが小さいか中程度で、データ値が中心から大きく外れているような場合を処理できない。

【0022】図2の棒グラフに示されているように、中間変数1に対するローディングを見ると、寄与図（図1）で識別された変数は、最大のローディングを持つ変数ではないことがわかる（ただし、これらのローディン

グについても実行し、各々の観測が1回だけ除外されるまで続ける。2乗予測誤差の和が最小である中間変数の数が、Dの選択値である。

【0020】多変量寄与：次に、本発明に従って寄与及び寄与図を定義する。寄与及び寄与図は、主成分分析法あるいは部分最小2乗法のいずれかで使用することができる。 T^2 に対する寄与は、単に t_{id}/σ_d 値として定義し、そして、これらの値を、任意のバッチにつき、寄与図と呼ばれる棒グラフで表わす。寄与図は、どの中間変数（単数あるいは複数）が、管理を外れている T^2 値に対して寄与しているかを示す。 $d=1 \rightarrow D$ に対して t_{id}/σ_d が棒グラフに作図されているとき、最も長いグラフは中間変数を示す。中間変数 d が最も長いグラフ（つまり、最も大きな値）であることから、それをこの方法で選択した場合、元の変数のどれが、この大きな中間変数の値になったかを判断する必要がある。 d 番目の中間変数の i 番目の観測の値は、次式で計算できる：【数11】

(7)

グはゼロにも近くない）。最大のローディングに着眼する従来技法に従うと、変数12、13、16及び17が解釈から取り残されている場合、この特定のバッチに関しては、調査者は誤った状態に陥ってしまうだろう。変数12、13、16及び17に対するローディングに加えてすべてのより大きなローディングを使用すると、解釈には、このバッチに無関係の変数が含まれてしまう。前述したように、最も大きなローディングを持つ変数の管理図を見ると、このバッチについては、最も大きなローディングを持つ変数が異常ではないことが確認できる。

【0023】従来は、部分最小2乗法には T^2 の概念は存在しなかった。本発明では、主成分分析法から類推して T^2 を定義する。数式（3）は、 t_{id} が、Xブロックに対する部分最小2乗法のスコアであるとき、そして、 σ_d がXブロックに対する部分最小2乗法の標準偏差であるとき、使用することができる。部分最小2乗法におけるスコア寄与は、数式（7）を使用して、主成分分析法と同様に定義する。ただし、 x_{ij} は、 $d > 1$ の場合、前回の次元の後の残留値として定義され、そして $d=1$ の場合、中心に配置され縮尺されたデータ自体として定義される。部分最小2乗法におけるYブロックのスコアは、 q_d で示すローディングベクトルを使用し、そして x_{ij} は y_{ij} にとって代わられる。ここで、 $d > 1$ の場合、 y_{ij} は前回の次元からの残留値であり、そして $d=1$ の場合、中心に配置され縮尺されたデータである。

【0024】上述したように、少数の簡単な計算により、すべての観測を行って、どの変数が異常であったかを判断することができる。主成分分析法あるいは部分最小2乗法を実行する際の手法は次の通りである。ここでは、 T^2 値を吟味するものとする。 T^2 が管理範囲より大きい場合、その観測になんらかの異常があったと結論する。反対に、 T^2 が管理範囲内にある場合、その観測は異常ではなかったと結論する。 T^2 が管理範囲より大きかった場合は、 T^2 の寄与図を計算して、作業を続行する。 T^2 の寄与図は、どの中間変数が、 T^2 の範囲外の値に寄与したかを示す。次に、 T^2 によって示された中間変数の最大中間変数に対する寄与を計算する。最後に、プロセスを調整して、指示されたプロセス変数あるいは製品変数の値を変更し、プロセスを制御の範囲内に戻す。バッチプロセスでは、上記手法は、バッチを廃棄して、最初からプロセスをやり直さなければならないこと*

$$x_S = \sum_{i \in S} w_i x_i$$

ここで、 w_i は、 S における複数の異なる観測値の総計に使用する重みの集合である。すると、新しいベクトル x_S を使用して、新しい中間変数を求めること、あるいはその中間変数に対する寄与を決定することができる。

【0027】 n 個の観測値の群の平均を求めたい場合、重み w_i を選択する一つの方法が存在する。すべての $i \in S$ につき、 $w_i = 1/n$ である。これは、スコアの散布図に点の集積が存在し、そしてこれらの点が共通して持っているものは何かを判断したいとき、役立つであろう。通常、このような集積は、原点を中心として集まることはなく、原点から離れるのが普通である。そこで、このバッチ集合が原点から離れた集積に入る原因となった、平均から外れた変数が、寄与によって与えられる。

【0028】同様に、特定の主成分分析法あるいは部分最小2乗法の次元に対して、中間変数値を時系列で作図したとき、それらの中間変数値に、段階的変化が認められた場合、段階的変化前の最後の n_1 個のバッチの平均と、段階的変化後の n_2 個のバッチの平均を比較する。この場合の寄与は、どのような変数（この部分最小2乗法あるいは主成分分析法次元によって取り込まれた変数）が変化したかを示す。上記の場合、段階的変化前に選択されたバッチが重み $w_i = -1/n_1$ を与えられ、以後に選択されたバッチが重み $w_i = 1/n_2$ を与えられる。

【0029】特定の次元に対するスコアにおける上向きあるいは下向きの「ずれ」を検出することができる。この場合、どのような変数が、このずれに寄与しているのかを判断する。ここでも、適切な重みに基づく寄与が、この判断に役立つ。選択した重みは、元のデータの傾斜を予測するものでなければならない。傾斜を予測するために使用できる重みの集合は、線形多項式のための直交多

*とを意味する。

【0025】観測群に対する寄与：上記の寄与の説明では、寄与はデータにおける単一の観測に適用する。しかし、本発明では、集合 S の複数の観測にも適用できる。この集合は、中間変数値の散布図上の観測の集積で構成される。あるいは、この集合は、中間変数値の時系列図において異常が認められる一連の観測である。たとえば、時系列の値が上方や下方にずれていたり、これらの値に段階関数の変化が存在する場合がある。以下、散布図上に集積が形成される理由と、時系列におけるずれあるいは段階関数変化の発生の原因について説明する。

【0026】まず、当該観測値を、なんらかの有意義な方法で、単に総計してみる。たとえば、次式が与えられる：

【数12】

(8)

項式係数である（ゼロを中心とした、単なる等間隔の値）。たとえば、10ポイント上方へずれている場合、重み w_i は、(順番に) $k [-1 \quad -7/9 \quad -5/9 \quad -3/9 \quad -1/9 \quad 1/9 \quad 3/9 \quad 5/9 \quad 7/9 \quad 9]$ となる。ここで、 k は任意の定数であり、単純に1に設定することができる。同様に、二次の傾斜が検出された場合、二次の直交多項式係数を使用できるであろう。重み w_i の選択は、当該の問題に大きく依存することは明らかである。上記の重みは、本発明の応用に非常に役立つことが判明した。

【0030】上記の調査手法（大きな T^2 を持つバッチから開始して、次に、そのバッチのスコアを調査する手法）に代わるものとして、スコアと傾斜の散布図から集積を検出する方法、あるいはスコアの時系列図からレベルの変動を検出する方法がある。集積、傾斜あるいはレベル変動は、 T^2 に明確に現れないことが多いが、スコアを順番に作図したものの中では、より顕著に現われる可能性がある。これらの2つの手法は、相互に補い合うものであり、データを調べる際には、両方とも使用すべきである。

【0031】残留値寄与：さらに、寄与の概念を、主成分分析法あるいは部分最小2乗法で求めた残留統計値にも適用することができる。残留値は、第二の代替変数であると考えることができる。つまり、主成分分析法あるいは部分最小2乗法を使って D 個の中間変数を解釈した後の、元のデータにおける未解釈の変化性と考えることができる。大きな残留値は、使用モデルが捕捉できなかった何かが、このバッチに発生したことを示すフラグである。ここでも、元のプロセス変数のどれが、この異常に大きな残留値に寄与しているかを調べなければならない。技術的に見ると、大きな残留値の発生には次のよう

な様々な原因がある。つまり、データ収集上の誤りや、小さなパーセンテージのバッチにだけ影響を及ぼしたプロセス変動（したがって、モデルに対して選択されたD個の中間変数に現れなかったプロセス変動）などである。あるいは、大きな残留値が新しいバッチに現われる場合（モデルの確定後に）、その大きな残留値は、その*

$$SPE = (X - TP)'(X - TP)$$

まず、観測iに対する残留値の寄与を求め、次に $x_i - t$ 、 P' のp個の値の棒グラフを作図する。どの長い棒も、主成分分析法によって適切に予測されなかった、この観測に対するプロセス変数あるいは製品変数を示す。ここで注意すべきことは、変数SPEの代替になる寄与としては、代替変数 T^2 に関して上述したのと同じ意味での中間変数は存在しない。プロセス変数あるいは製品変数の寄与は直接計算しなければならない。

【0033】部分最小2乗法では、最後の次元の計算の後で、残留行列（Xブロックに対する行列とYブロックに対する行列）がアルゴリズムによって実際に与えられる。XブロックあるいはYブロックのいずれかに対する単一の統計値は、単に観測iに対する残留ベクトルの2乗の和として計算することができる。任意の観測は、Xブロック又はYブロックもしくはその両方に大きな残留統計値を持っている場合がある。そして、寄与図は、これらの変数のどれが適切にモデル化されていないかを示す。Yブロックに2個以上の変数が存在する場合、寄与図はそれらのどれが適切に予測されなかったかを示す。

【0034】作図のための寄与の縮尺：中間変数の値に対する寄与を作図するにあたり、二つの異なる縮尺方法を使用した。その目的は、最大の寄与を持つプロセス変数あるいは製品変数を、他の変数より際立たせることである。上記の二つの方法は約に立つことが判明した。寄与図において、これら二つの方法は、図の拡大あるいは縮小の効果を与えるが、棒の高さのパターンは変化しない。図示した寄与図は、下記の方法1を使用して作図したものである。 T^2 及びSPEに対する寄与は縮尺されていない。

【0035】方法1-最大スコアの縮尺：次元dに関し、 $x_{i,j}p_{j,d}/\max_j |x_{i,j}p_{j,d}|$ 、 $j=1, \dots, p$ を作図する。この方法では、バッチiに対する寄与を、すべてのバッチに対する寄与の最大値と、絶対値で比較する。バッチiに対する寄与が ± 1 だとすると、これは、この変数に関するすべてのバッチの平均からの最大の偏差を示す。

【0036】方法2-バッチ内の縮尺：次元dに関し、 $x_{i,j}p_{j,d}/\sum_j |x_{i,j}p_{j,d}|$ 、 $j=1, \dots, p$ を作図する。この方法において、最も長い棒は、まさしくこの特定のバッチのスコアに最も大きく寄与する変数を示し、そしてその棒の長さは、その変数の寄与度にほぼ比例する（値 $x_{i,j}p_{j,d}$ のすべてが同じ符号の場合は、棒の長さは寄与度に厳密に比例す

*モデルを構築するために使用したデータに存在しない新しいプロセス変動を示す。

【0032】観測iに対する主成分分析法残留値は、2乗予測誤差と呼ばれ、次式から求めることができる：

【数13】

(9)

る）。

【0037】寄与図の適用：

例1- T^2 寄与：本例及び以下の例で使用したデータは、乳剤製造プロセスから収集したものである。乳剤製造プロセスは図3に模式的に示されている通りである。写真乳剤は、ケトル100で調製される。ケトル100には加熱ジャケット111が備えられており、そしてケトルの中身は攪拌装置114によって攪拌される。硝酸銀溶液供給槽116から供給された硝酸銀溶液と、塩溶液供給槽118から供給された塩溶液が、それぞれ、硝酸銀溶液ポンプ120及び塩溶液ポンプ122、そしてコンピュータで制御された弁124及び126を通じて装填される。硝酸銀溶液の流量と圧力は、それぞれ流量センサ130と圧力センサ128で監視される。塩溶液の流量と圧力は流量は、それぞれ流量センサ132と圧力センサ134によって監視される。ケトル110の中身112の温度、銀濃度（vAg）及びpHは、それぞれ温度センサ136、vAgセンサ138、pHセンサ140によって監視される。これらのすべてのセンサ128～140の出力は、診断用コンピュータ142とプロセス制御用コンピュータ122に供給される。診断用コンピュータ142とプロセス制御用コンピュータ122は、データリンク146を介して相互に通信する。表示モニタ148と操作パネル150を含む操作卓が、診断用コンピュータ142に接続されている。同様な操作卓がプロセス制御用コンピュータにも備えられている。

【0038】動作を説明すると、1作業分の写真乳剤は、次の段階を経て製造される。まず、測定した量のゼラチンと水とその他の化学添加物でケトル110の下準備を行なう。次に、プロセス制御用コンピュータが加熱ジャケット111に命令を出し、攪拌装置114を動作させながら、ケトル110の中身を所望の動作温度に加熱する。所望の温度に到達したら、プロセス制御用コンピュータは、硝酸銀溶液ポンプ120と塩溶液ポンプ122を始動し、弁124と126を再循環位置に設定し、硝酸銀溶液と塩溶液が、それぞれの供給槽から、弁124と126を通じて、再びそれぞれの供給槽へ再循環するようにする。

【0039】操作員の指示により、プロセス制御用コンピュータは、診断用コンピュータに指令を出し、センサ128～140からのデータの記録を行わせる。所定の時間が経過した後、プロセス制御用コンピュータは弁1

24と126を切り換えて、硝酸銀溶液と塩溶液をそれぞれの供給槽からケトル110に投入する。硝酸銀溶液と塩溶液がケトル110に投入されると、診断用コンピュータ142が、たとえば1分、10分、20分などの所定の時間間隔で、そして作業の終了時に、代替変数の値を計算し、得られた結果をプロセス制御用コンピュータ144に送出する。プロセス制御用コンピュータ144は、代替変数の値を監視し、代替変数が管理範囲から外れた時間を検出する。

【0040】管理外の状態が検出されると、診断用コンピュータ142は、プロセス制御用コンピュータ144の指令を受けて、中間変数に基づき、管理外の代替変数に対する寄与を計算する。最大の寄与を持つ中間変数を識別し、プロセス変数による最大中間変数に対する寄与を計算する。識別された中間変数に対する最大の寄与を持つプロセス変数を識別する。識別されたプロセス変数が持つある種のパターンは、製造中の特定の製品の特定のプロセス障害の徴候を示している。このプロセスから得られた経験によれば、特定の製品に対する特定の障害に関連して繰り返し発生するパターンのライブラリが構築されるので、そのライブラリを使用することにより、障害分析が容易になる。不良品の原因となる、任意の製品に対する特定の障害を表わすパターンがいくつか知られている。プロセス制御用コンピュータ144は、これらのパターンが発生すると、乳剤製造プロセスを自動的に打ち切るようにプログラミングされている。不良品につながらないその他のパターンはコンピュータに記憶され、後で操作員が解析する。代替変数の計算と、代替変数に対する寄与の計算の結果が、操作卓148に表示されるので、操作員は障害を診断し、問題を解決することができる。

【0041】以下の例では、27個のプロセス変数を使用する。即時温度読取りのような場合、プロセス変数は、センサの読取り値から直接判定される。平均値のような場合には、プロセス変数は、多数のセンサ読取り値から計算される。

【0042】合計で230のバッチを使用して、このプロセスのモデルを、ローディングPで表わされるものとして、構築した。10個の中間変数を持つ主成分分析法モデルを構築した。このモデルの構築に使用したデータの集合の T^2 管理図を図4に示す。いくつかのバッチが T^2 管理範囲から外れており、これらはプロセス制御用コンピュータ144によって打ち切られた。さらに調査するため、最大の T^2 値を持つバッチ、つまりx軸上の60番目のバッチを選択した。図5は、このバッチに関する T^2 に対する寄与を示す。同図を見ると、中間変数1及び2が、 T^2 統計値によって異常であると指摘されているこのバッチに対する主要な寄与であることがわかる。

【0043】例2…中間変数に対する寄与：図6は、バ

ッチ60の最初の中間変数に対する寄与を示す。6本の長い棒があり、それぞれプロセス変数3、5、19、22、25、26に対応している。これらの変数は、バッチの最初の段階における、銀濃度の、設定値からのずれ(3)、バッチの最初の段階における、2つの異なる時間において測定された銀濃度の差(5)、バッチの第二段階における、銀濃度の標準偏差(19)、バッチの第二段階における、塩溶液流量の標準偏差(22)、投入した塩溶液の総量(25)、そして、最終的な銀濃度(26)である。技術的に解釈すると、第一段階(いくつかの異なる変数によると)及び第二段階において、銀濃度が異常であることが検出され、それを補償するために塩溶液が追加されたが、最終的な銀濃度が依然として異常なので、補償が不十分だったということになる。本質的には、中間変数に対するローディングを解釈するすなわち、寄与図を使用して、処理の事象の技術的な解釈に至った。これは、発明者が見出した数学的中间変数に意味を与える上で、より有用な方法である。

【0044】例3—残留寄与： T^2 寄与に対する分析と同じ分析を、主成分分析法から得たSPE統計値に対しても行なうことができる。SPE統計値の管理図を図7に示す。大きなSPE値を持つバッチは、10個の中間変数からなる主成分分析法モデルでは捕捉できなかった事象を示している。図8は、バッチ101に関する、SPEに対する寄与を示す。バッチ101は最大のSPE値を呈している。

【0045】図8に示されているように、変数22、25及び26は、主成分分析法モデルの最初の10個の中間変数が、それらの挙動を説明できなかったという点で、異常である。これらの変数は、バッチの第二段階において行われた動作に対応するので、技術的解釈は、塩溶液流量と最終銀濃度が異常だったので、追加的な処置を施すべきであったということになる。このバッチは、 T^2 によっても指摘されていることが判明したので、 T^2 に対する寄与とスコアに基づいて、さらに調査する必要がある。この調査により、このバッチの温度に関する問題が存在することが判明するであろう。

【0046】例4—散布図上の集積に対する寄与：寄与図の他の用途は、主成分分析法の散布図上の集積の共通原因を識別することである。中間変数1及び2の散布図を、図9に示す。図の左上に点の集積が認められる。この領域の平均中間変数値の寄与図を、図10に示す。図10は、中間変数1及び2の両方に対する寄与を示す。この場合、中間変数1及び2の両方によって同一のプロセス変数が示されているが、常にそうであるとは限らない。プロセス変数12、13、16及び17は、これらの寄与図によって示される。プロセス変数12及び13は、硝酸銀溶液圧力の測定値を示し、プロセス変数16及び17は、塩溶液圧力の測定値を示す。したがって、バッチの上記集積の問題を解釈すると、二つの溶液供給

システム間の圧力が大きく異なるということになる。

【0047】例5-時系列変化に対する寄与：ここでは、部分最小2乗法の一つの応用について説明する。3σ個の限界を持つ時系列における中間変数1（図11参照）の値を示す。ここで、σは中間変数1の値の標準偏差である。これは、実際には、最初の中間変数の管理図である。ここで、時間74において、どのプロセス変数が変化したかを調べてみる（これは、図上のバッチ74の下向きのレベル変化に対応する）。図12に示されているように、その前後の5個のバッチが選択され、このプロセス変化に対する寄与が判定される。前後の5個のバッチの選択は、問題に依存するので、他の標本サイズを使用することもできる。この部分最小2乗法による寄与図には、28本目の棒が存在することに注意すべきである。この棒は、単一の製品変数の粒度に対する寄与を示す（複数の製品変数が存在する場合、この寄与図の棒がさらに増えることは当然である）。

【0048】この時点で変化したプロセス変数は、プロセス変数11、20及び21であり、そしてプロセス変数28である。個々のプロセス変数の管理図と、製品変数の管理図は、実際にこの時点で変化があったことを示している。このプロセス変化を解釈すると、硝酸銀溶液流量の、所望の値からのずれ（11）が異常であったということになる。つまり、バッチの後半部において、硝酸銀溶液圧力（20）と硝酸銀溶液流量（21）が急上昇したことを示す。この時点で、プロセス及び製品の両方が変化し、したがって、製品の変化を少なくするため、この情報に基づくプロセス改良を行なうことが期待される。また、この時点では、塩溶液供給システムは変化しなかったことがデータに示されていることに注意すべきである。したがって、このプロセスの問題は、どこか別の所に存在することは明らかである。

【0049】以上、本発明を写真乳剤製造を例にとりて説明したが、本発明は、統計的プロセス制御が適用できるその他の製造プロセスに容易に適用できることは明らかであろう。

【0050】

【発明の効果】本発明によれば、プロセスの動作中に、プロセスと製品の両方あるいは一方の複数の変数を示すデータを収集し、多変量解析法を使用して、プロセスが管理されているかどうかを示す値を持つ代替変数を発生し、代替変数の値が、プロセスが所定の範囲から外れた時間を示すとき、どの中間変数がその代替変数に最も寄与しているかを判定し、上記工程で判定された中間変数につき、どのプロセス変数が、判定された中間変数の値に最も寄与しているかを判定し、そして、プロセスを修正して、上記工程で識別されたプロセス変数を変更し、プロセスを所定の範囲内に戻すようにしたので、従来困難であった、とくにプロセス変数の数が増えた場合の、

問題の発生源の識別が容易に行える。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明による方法の実施において有用な中間変数と寄与の関係をグラフで例示した図である。

【図2】本発明と従来技術を比較する上で有用な、ローディングとプロセス変数との関係をグラフで例示した図である。

【図3】本発明による方法で管理した乳剤析出プロセスの概略図である。

10 【図4】本発明による代替変数 T^2 の値を示す管理図を例示した図である。

【図5】代替変数 T^2 に対する中間変数の寄与をグラフで示した図である。

【図6】図5の最初の中間変数に対するプロセス変数の寄与をグラフで示した図である。

【図7】SPE統計法の管理図である。

【図8】図7のバッチ101のSPEに対するプロセス変数の寄与を棒グラフで示した図である。

20 【図9】中間変数1と中間変数2の関係を散布図で示した図である。

【図10】図9で識別されたクラスタからの平均中間変数の寄与をグラフで示した図である。

【図11】時系列で示した中間変数1の値をグラフで示した図である。

【図12】バッチ69～78に対するプロセス変数1の寄与をグラフで示した図である。

【符号の説明】

110 ケトル

111 ケトルの加熱ジャケット

112 ケトルの中身

114 攪拌装置

116 硝酸銀溶液供給槽

118 塩溶液供給槽

120 硝酸銀溶液ポンプ

122 塩溶液ポンプ

124 硝酸銀溶液をケトル弁に再循環する装置

126 塩溶液をケトル弁に再循環する装置

128 硝酸銀溶液圧力センサ

130 硝酸銀溶液流量センサ

40 132 塩溶液流量センサ

134 塩溶液圧力センサ

136 ケトル温度センサ

138 硝酸銀濃度センサ (v a g)

140 p Hセンサ

142 診断用コンピュータ

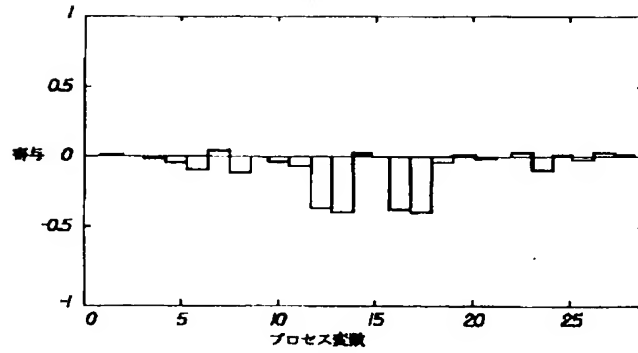
144 プロセス制御用コンピュータ

146 デジタル通信リンク

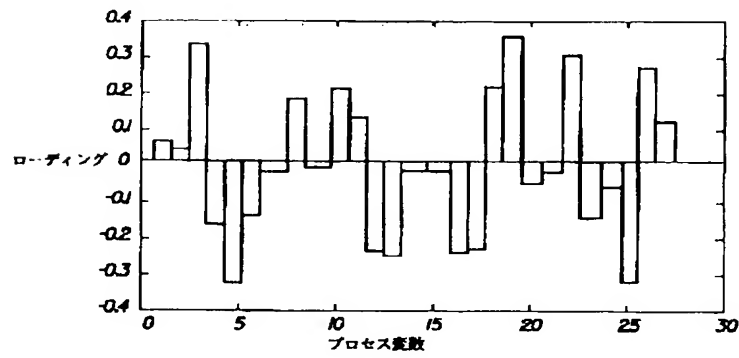
148 診断用表示端末

150 プロセス制御用表示端末

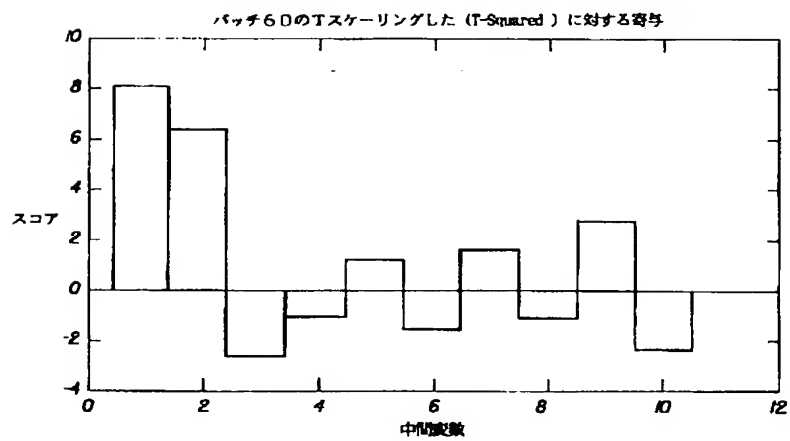
【図1】



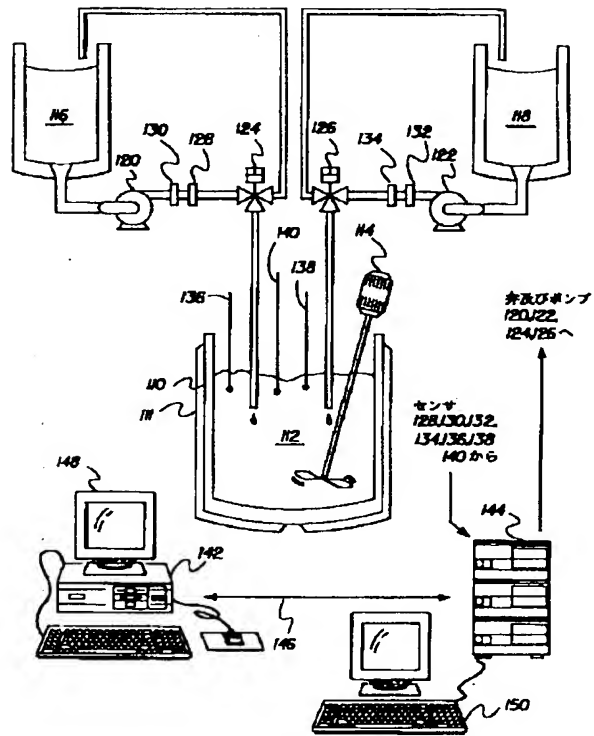
【図2】



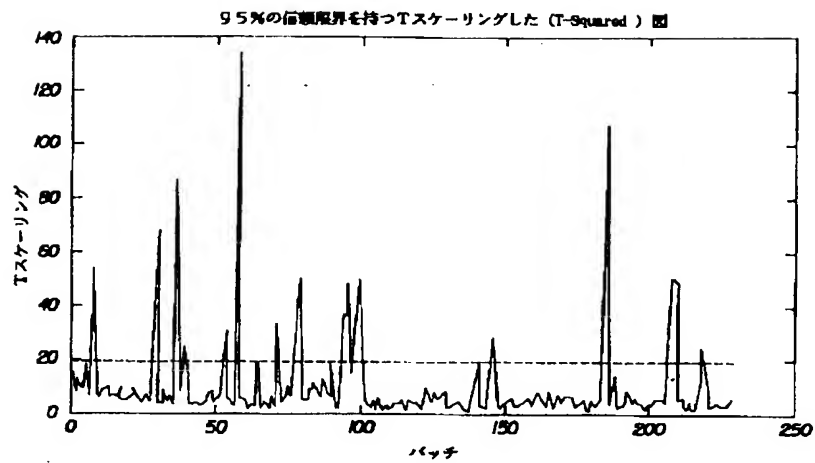
【図5】



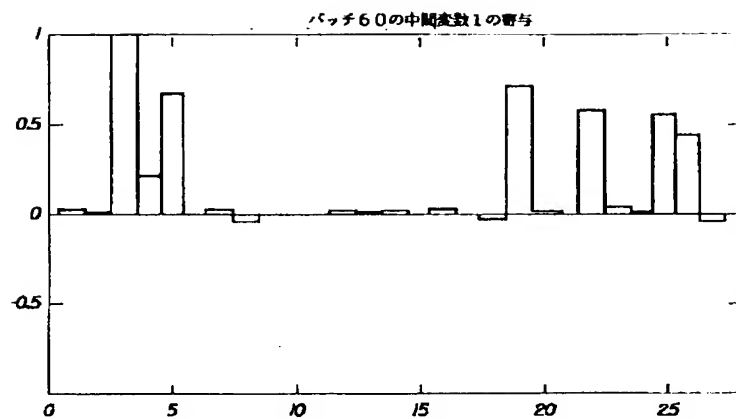
【図3】



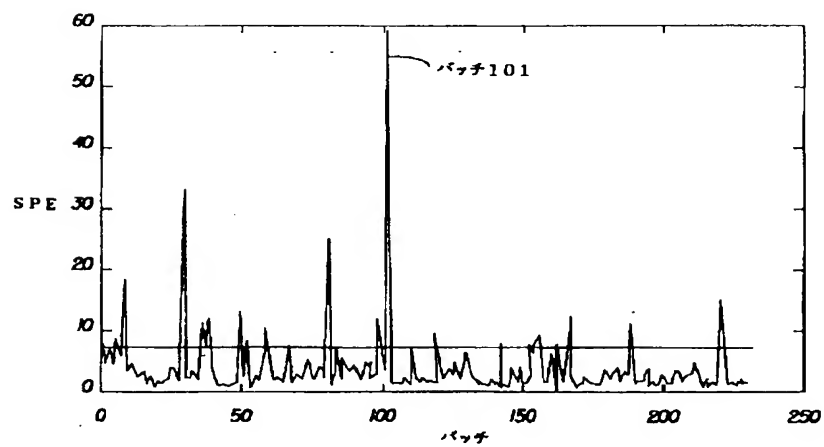
【図4】



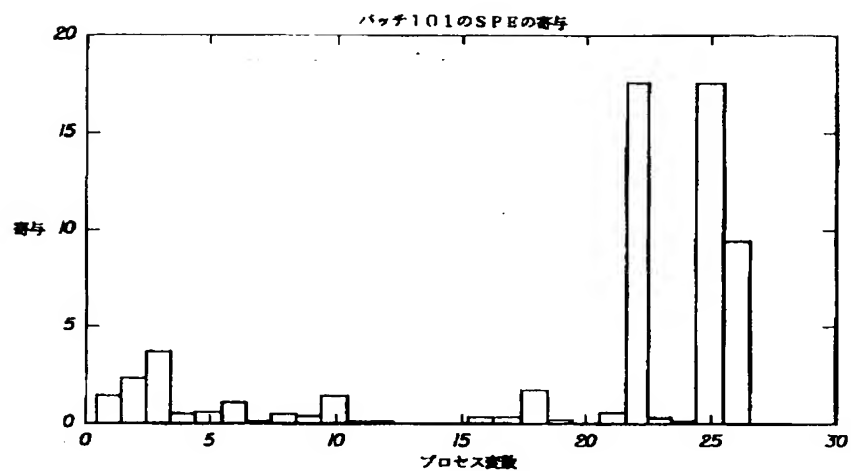
【図6】



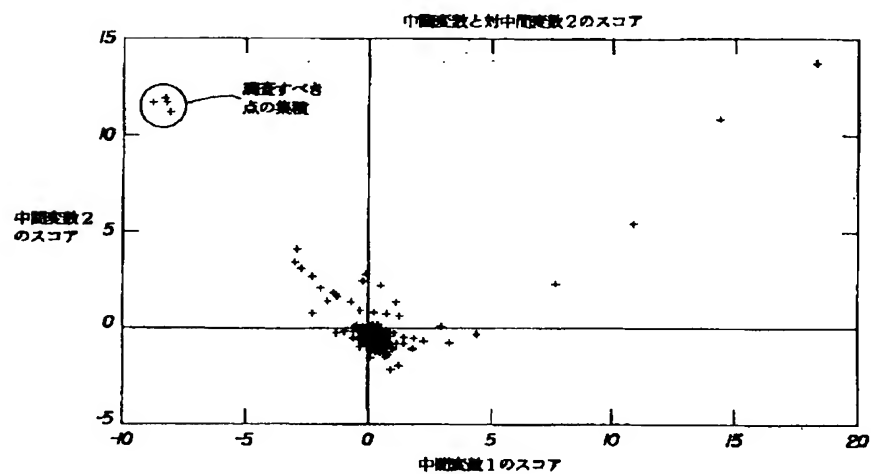
【図7】



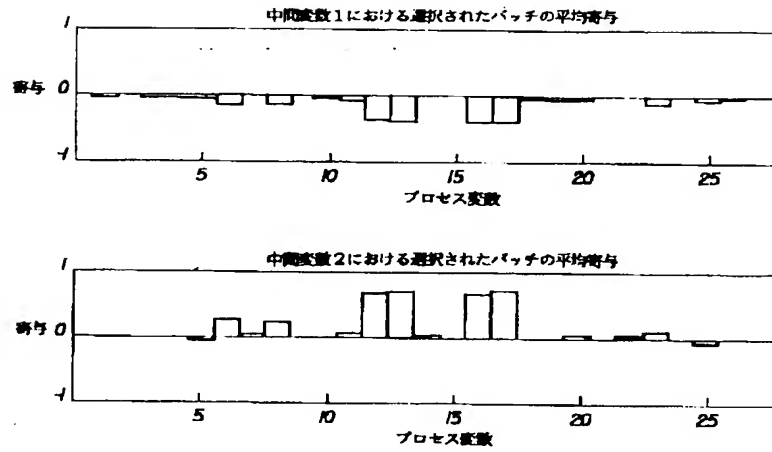
【図8】



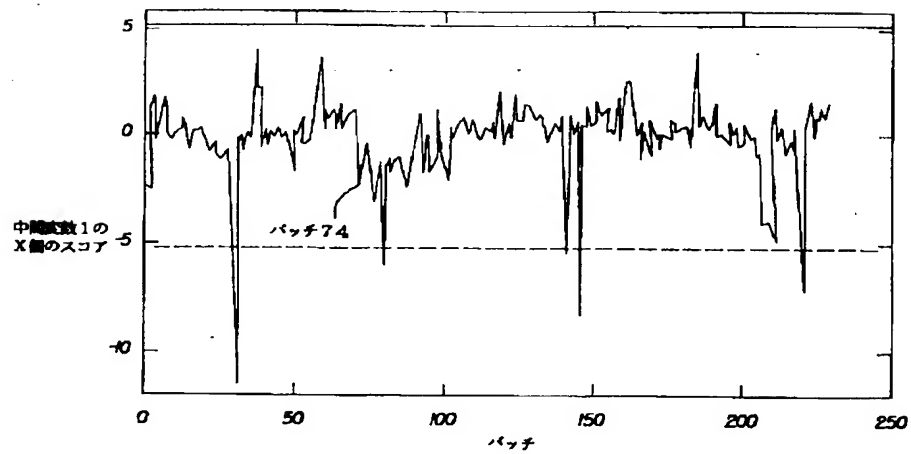
【図9】



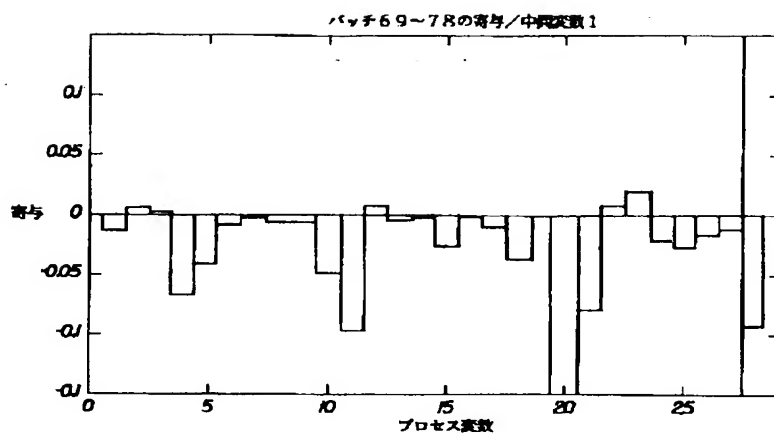
【図10】



【図11】



【図12】



フロントページの続き

(72)発明者 ロナルド エディ スワンソン
 アメリカ合衆国 ニューヨーク州 ロチェ
 スター クリアブルック ドライブ 123

(72)発明者 ジョン ジョセフ シャイブル
 アメリカ合衆国 ニューヨーク州 フェア
 ボート セルボーン チェイス 173